



SỬ DỤNG PHƯƠNG PHÁP XFEM/LEVEL-SET ĐỂ KHẢO SÁT ẢNH HƯỞNG CỦA KÍCH THƯỚC, HÌNH DẠNG CỐT LIỆU TỚI HỆ SỐ DẪN NHIỆT HIỆU QUẢ CỦA VẬT LIỆU KHÔNG ĐỒNG NHẤT

Trần Anh Bình^{1*}

Tóm tắt: Bài báo trình bày một phương pháp tính trên cơ sở phương pháp phần tử hữu hạn mở rộng XFEM kết hợp với phương pháp level-set để mô phỏng cấu trúc vi mô của vật liệu nhiều thành phần. Dạng hàm level-set được đề xuất để mô tả bề mặt của một số hình dạng cốt liệu. Hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu chứa lỗ rỗng hoặc cốt liệu được tính toán bằng phương pháp XFEM. Việc khảo sát sự ảnh hưởng của hình dạng, kích thước cốt liệu được thực hiện một cách đơn giản thông qua việc thay đổi các thông số hình học của hàm level-set.

Từ khóa: XFEM/level-set; ảnh hưởng của hình dạng cốt liệu; ảnh hưởng của kích thước cốt liệu; hệ số dẫn nhiệt hiệu quả.

Summary: This paper presents a computational technique based on Extended Finite Element Method (XFEM) and level-set function method to model microstructure of multi-phase material. A level-set function is then proposed to model some types of interface. The effective conductivity of materials containing holes or inclusions is computed within XFEM framework. The effect of inclusion shape and inclusion size on effective thermal conductivity is simply analyzed by varying geometric parameters of level-set function.

Keywords: XFEM/level-set; effect of inclusion shape; effect of inclusion size; effective conductivity.

Nhận ngày 18/5/2016, chỉnh sửa ngày 28/7/2016, chấp nhận đăng 16/01/2017



1. Mở đầu

Vật liệu không đồng nhất nhiều thành phần ngày càng được sử dụng rộng rãi trong các ngành công nghiệp vật liệu. Rất nhiều nghiên cứu đã được thực hiện nhằm xác định tính chất dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu thông qua các phương pháp giải tích [1-7] hoặc các phương pháp số [8-11]. Các phương pháp số phần lớn dựa trên phương pháp phần tử hữu hạn (finite element method), sai phân hữu hạn (finite difference method), phương pháp biến đổi nhanh chuỗi Fourier (fast Fourier transform), phương pháp phần tử biên (boundary element method). Một số nghiên cứu về ảnh hưởng của hình dạng, kích thước của cốt liệu cũng đã được đưa ra dựa trên các phương pháp tính toán gần đúng hoặc phương pháp số [12-14]. Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất sử dụng kết hợp phương pháp XFEM và hàm level-set để khảo sát ảnh hưởng của hình dạng cốt liệu tới tính chất dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu không đồng nhất.

Để mô hình hóa cốt liệu trong phương pháp phần tử hữu hạn, người ta phải chia lưới sao cho mắt lưới trùng với bề mặt của cốt liệu. Điểm mạnh của phương pháp XFEM/Level-set là có thể mô hình hóa các dạng bề mặt bất kỳ với lưới đều, các mắt lưới không cần trùng với bề mặt của cốt liệu. Một loạt các nghiên cứu về ứng dụng của phương pháp này để mô tả các bề mặt bất kỳ hoàn hảo (perfect interface) và không hoàn hảo (imperfect interface) đã được công bố [15-21]. Bài báo này đề xuất sử dụng một hàm level-set có khả năng mô tả một số họ các hình dạng cốt liệu phức tạp. Sau đó, ảnh hưởng của hình dạng cốt liệu và kích thước cốt liệu tới mô đun dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu sẽ được khảo sát bằng cách dùng phương pháp phần tử hữu hạn mở rộng XFEM/Level-set.



2. Phương pháp XFEM/Level-set

Để mô hình hóa vật liệu nhiều thành phần, phương pháp phần tử hữu hạn (FEM) yêu cầu lưới trùng với bề mặt của cốt liệu. Công đoạn này sẽ gặp khó khăn đối với mô hình 3D phức tạp hoặc đối với cốt liệu có bề mặt thay đổi. Trái lại, phương pháp XFEM sử dụng một hệ lưới đều và các hàm làm giàu (enrichment functions) để mô tả bước nhảy (về nhiệt hoặc luồng nhiệt) qua bề mặt của cốt liệu. Sukumar và cộng sự [17] là người đầu tiên kết hợp

¹ TS, Khoa Công nghệ Thông tin, Trường Đại học Xây dựng.

*Tác giả chính. E-mail: anh-binh.tran@nuce.edu.vn.

giữa XFEM và hàm level-set để mô tả bề mặt cốt liệu. Ký hiệu Γ_I là bề mặt tiếp xúc giữa cốt liệu và pha nền, khi đó Γ_I được định nghĩa là tập hợp các điểm tại đó hàm level-set nhận giá trị 0, tức là: $\phi: \mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}$:

$$\Gamma_I = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^d \mid \phi(\mathbf{x}) = 0\} \quad (1)$$

trong đó, d là số chiều của không gian bài toán (ví dụ: $d=3$ nghĩa là bài toán 3D).

Để đưa sự không liên tục vào một phần tử bị cắt bởi bề mặt cốt liệu, phương pháp XFEM sử dụng công thức nội suy như sau:

$$T^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n N_i(\mathbf{x}) T_i + \sum_{j=1}^m N_j(\mathbf{x}) F(\mathbf{x}) a_j \quad (2)$$

trong đó, N_i là hàm dạng của phương pháp phần tử hữu hạn thông thường, N_j là hàm dạng gắn với nút của phần tử bị bề mặt cốt liệu cắt qua. Các bậc tự do a_j được thêm vào các nút của phần tử bị bề mặt cốt liệu cắt qua. Trong bài báo này, chúng tôi giới hạn trong bài toán đàn hồi tuyến tính, biến dạng bé và bề mặt tiếp xúc hoàn hảo. $F(\mathbf{x})$ gọi là hàm làm giàu, được đề xuất bởi Moes [22]:

$$F(\mathbf{x}) = \sum_i |\phi_i| N_i(\mathbf{x}) - \left| \sum_i \phi_i N_i(\mathbf{x}) \right| \quad (3)$$

Hàm $F(\mathbf{x})$ thể hiện bước nhảy của nhiệt độ khi đi qua bề mặt của cốt liệu.

Một khi hàm level-set được định nghĩa, các giá trị của hàm level-set tại các mắt lưới sẽ được tính toán và lưu lại. Sau đó, bề mặt của cốt liệu được xác định một cách gần đúng như sau: gọi ϕ_i và ϕ_j lần lượt là giá trị của hai hàm level-set tại các điểm I, J có tọa độ $\mathbf{x}_i$ và $\mathbf{x}_j$, trong đó IJ là một cạnh của một phần tử, cạnh IJ cắt hàm bề mặt cốt liệu nếu $\phi_i \phi_j < 0$, khi đó:

$$\mathbf{x}_p = \mathbf{x}_i + \xi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i), \quad \xi = -\frac{\phi_i}{\phi_j - \phi_i} \quad (4)$$

trong đó, $\mathbf{x}_p$ là giao điểm giữa bề mặt cốt liệu và cạnh IJ của phần tử.

Xét một miền Ω , phương trình cơ bản của bài toán nhiệt được trình bày như sau:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}) - r(\mathbf{x}) = 0 \text{ trong } \Omega \quad (5)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -c(\mathbf{x}) \nabla T(\mathbf{x}) \quad (6)$$

Trong phương trình trên, $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ là ký hiệu của luồng nhiệt, $r(\mathbf{x})$ là nguồn nhiệt và $c(\mathbf{x})$ là hệ dẫn nhiệt. Sử dụng phương pháp XFEM/Level-set, biến đổi dạng biến phân sẽ thu được hệ phương trình tuyến tính có dạng:

$$\mathbf{K}\mathbf{D} = \mathbf{Q}, \mathbf{D} = \{\mathbf{T} \quad \mathbf{a}\}^T \quad (7)$$

trong đó, $\mathbf{D}$ là véc-tơ ẩn số, $\mathbf{K}$ và $\mathbf{Q}$ lần lượt là ma trận độ cứng và véc-tơ nhiệt. Ma trận $\mathbf{K}$ và véc-tơ $\mathbf{Q}$ được định nghĩa như sau:

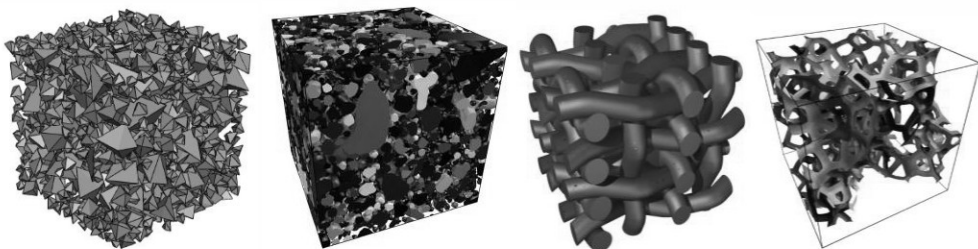
$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{C}(\mathbf{x}) \mathbf{B} d\Omega, \quad \mathbf{Q} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T r d\Omega. \quad (8)$$

trong đó $\mathbf{B}$ và $\mathbf{N}$ là ma trận đạo hàm của hàm dạng của phép nội suy trong phương trình (2). Điều kiện biên tuần hoàn cũng sẽ được thêm vào thông qua việc cài đặt phương pháp nhân tử Lagrange (Lagrange multiplier).



3. Hàm Level-set

Hàm level-set được dùng phổ biến để mô tả hình dạng của các bề mặt. Nó tựa như hàm bình đồ trong ngành trắc địa bản đồ. Trên thế giới đã có rất nhiều nghiên cứu liên quan đến việc sử dụng hàm level-set để mô tả hình dạng các cốt liệu. Hình 1 thể hiện một số hình dạng cốt liệu đã được nghiên cứu [22-25].

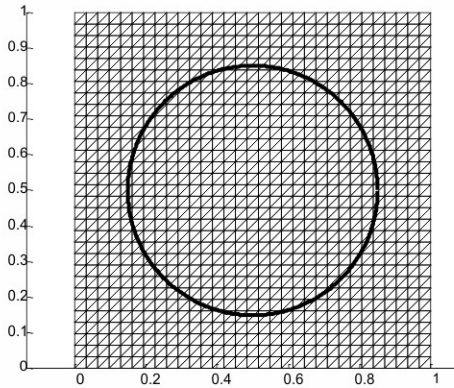


Hình 1. Hình dạng một số cốt liệu được mô tả bởi hàm level-set

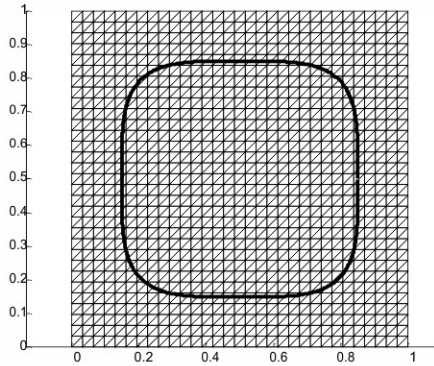
Nghiên cứu trong bài báo này giới hạn trong các bài toán 2D, việc mở rộng bài toán sang 3D được tiến hành một cách tương tự. Hàm level-set được đề xuất dưới dạng sau:

$$\begin{cases} \phi = \left(\frac{x-x_c}{r_x} \right)^{2p} + \left(\frac{y-y_c}{r_y} \right)^{2p} - 1 \\ r = r_0 + a \cos(b\theta) \\ x = x_c + r \cos(\theta) \\ y = y_c + r \sin(\theta) \end{cases} \quad (9)$$

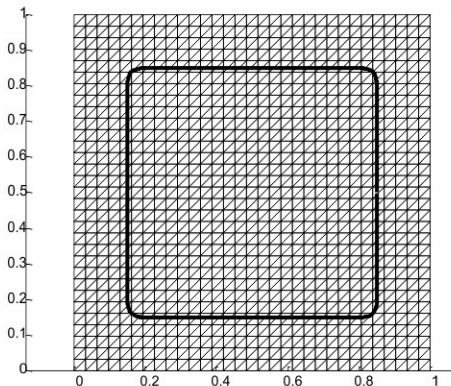
trong đó, x_c, y_c là tọa độ tâm của cốt liệu. r là bán kính cốt liệu, góc θ dùng để quy đổi về hệ tọa độ cầu. Hình dạng của cốt liệu được minh họa ở Hình 2 với các giá trị tham số khác nhau.



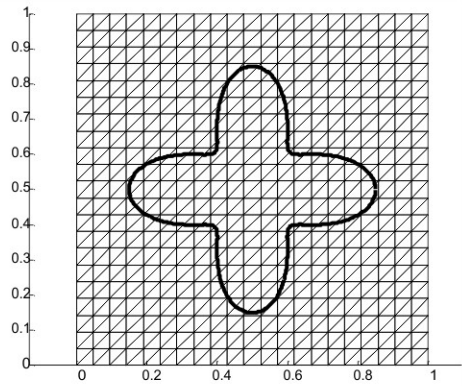
a) $x_c=0.5; y_c=0.5;$
 $p=1; A=0; r_0=0.35$



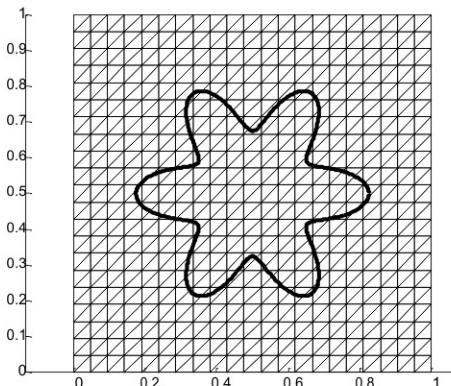
b) $x_c=0.5; y_c=0.5;$
 $p=2; A=0; r_0=0.35$



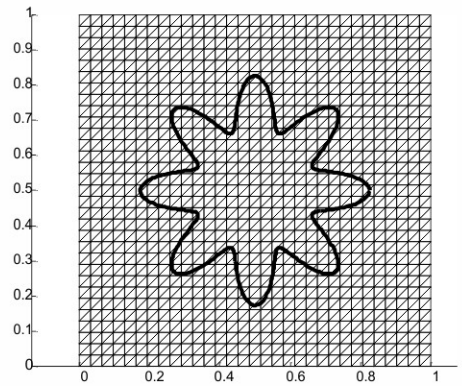
c) $x_c=0.5; y_c=0.5;$
 $p=10; A=0; r_0=0.35$



d) $x_c=0.5; y_c=0.5; p=2;$
 $A=0.3r_0; B=4; r_0=0.25$

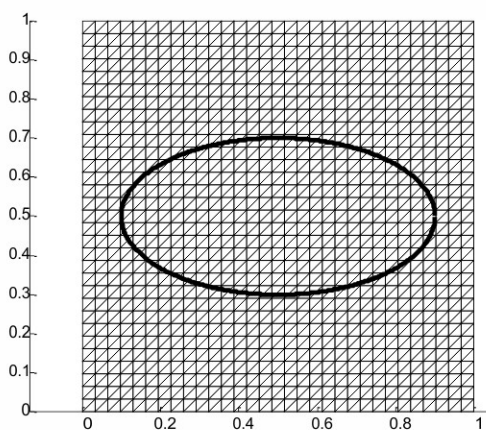


e) $x_c=0.5; y_c=0.5; p=1;$
 $A=0.3r_0; B=6; r_0=0.25$

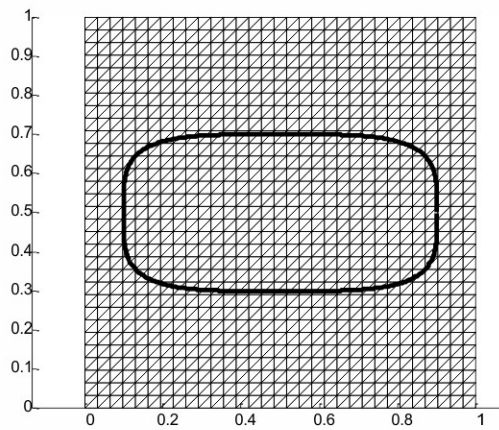


f) $x_c=0.5; y_c=0.5; p=1;$
 $A=0.3r_0; B=8; r_0=0.25$

Hình 2. Hình dạng của một số loại cốt liệu với các tham số khác nhau



a) $x_c = 0.5; y_c = 0.5; p = 1;$
 $a = 0.2; b = 0.4$



b) $x_c = 0.5; y_c = 0.5; p = 2;$
 $a = 0.2; b = 0.4$

Hình 3. Hình dạng của một số loại cốt liệu với các tham số khác nhau

Một đề xuất khác của hàm level-set có được mô tả dưới công thức sau:

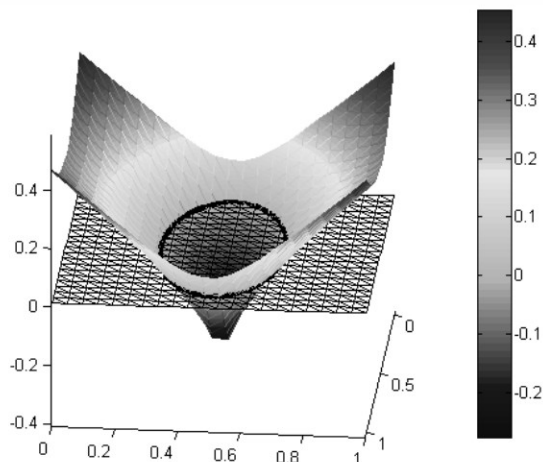
$$\begin{cases} \phi = \left(\frac{x-x_c}{a} \right)^{2p} + \left(\frac{y-y_c}{b} \right)^{2p} - 1 \\ \gamma = \frac{a}{b} \end{cases} \quad (10)$$

Hình 3 mô tả hình dạng của cốt liệu với một số giá trị của các tham số khác nhau. Hàm level-set có giá trị âm ở trong cốt liệu, có giá trị bằng 0 trên bề mặt cốt liệu và có giá trị dương bên ngoài bề mặt cốt liệu. Hình 4 thể hiện giá trị của hàm level-set dùng để mô tả cốt liệu hình ellip.



4. Khảo sát ảnh hưởng của hình dạng và kích thước cốt liệu tới hệ số dẫn nhiệt hiệu quả

Phương pháp XFEM sẽ được lập trình trong phần mềm Matlab để tính toán hệ số dẫn nhiệt hiệu quả k_{eff} của vật liệu. Xét một mẫu vật liệu kích thước đơn vị, các thông số vật liệu được lấy như bảng 1 cho 2 trường hợp i) trường hợp vật liệu chứa cốt liệu, ii) vật liệu chứa lỗ rỗng. Đơn vị của hệ số dẫn nhiệt trong Bảng 1 có thể lấy bất kỳ trong hệ thống các đơn vị của hệ số dẫn nhiệt.

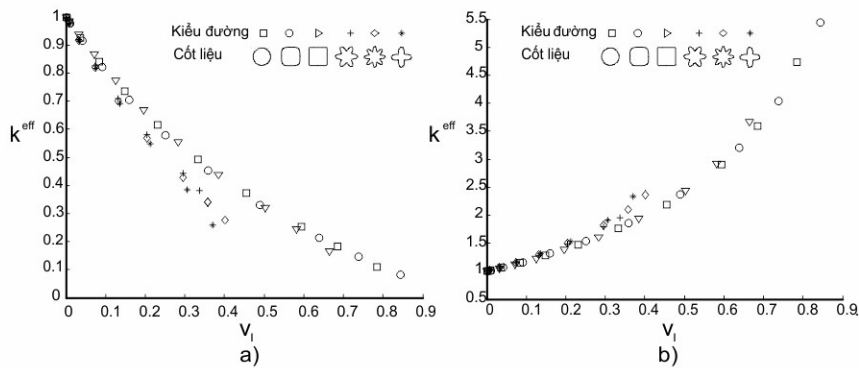


Hình 4. Giá trị của hàm level-set dùng để mô tả cốt liệu hình ellip

Bảng 1. Các thông số vật liệu

Hệ số dẫn nhiệt	Hệ số dẫn nhiệt của pha nền k_m	Hệ số dẫn nhiệt của cốt liệu k_i
Vật liệu chứa cốt liệu	1	10
Vật liệu chứa lỗ rỗng	1	10^{-5}

Đầu tiên, ta khảo sát ảnh hưởng của hình dạng cốt liệu trong Hình 2. Ảnh hưởng của kích thước cốt liệu cũng được khảo sát thông qua việc tăng bán kính r_0 từ 0 đến giá trị lớn nhất sao cho cốt liệu không cắt biên của mẫu vật liệu. Các kết quả khảo sát được trình bày trong Hình 5. Để nhận thấy, cũng một thể tích lỗ rỗng v_r , vật liệu có lỗ rỗng hình hoa sẽ dẫn nhiệt kém hơn vật liệu có lỗ rỗng hình tròn hoặc hình vuông. Ngược lại, nếu cốt liệu dẫn nhiệt tốt hơn pha nền thì vật liệu có cốt liệu hình hoa sẽ dẫn nhiệt tốt hơn vật liệu có cốt liệu hình tròn khi so sánh trên cùng một thể tích chiếm chỗ v_i . Khi hình dạng cốt liệu biến đổi từ hình tròn dần thành hình vuông (p chạy từ 1 đến ∞) thì hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu gần như không thay đổi.



Hình 5. Hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu minh họa ở Hình 2 với các trường hợp vật liệu a) lỗ rỗng; b) cốt liệu

Tiếp theo, ta đi khảo sát ảnh hưởng của độ dẹt γ được định nghĩa trong phương trình (10), tức ảnh hưởng của hình dạng cốt liệu, tới hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu. Khảo sát được tiến hành bằng cách thay đổi γ sao cho tỷ lệ chiếm chỗ của cốt liệu $v_l = 0.25$. Hệ số dẫn nhiệt hiệu quả sẽ được tính toán cho 3 trường hợp $p = 1, 2$ và 10. Diện tích của cốt liệu có hình dạng được mô tả trong (10) được tính toán theo công thức sau:

$$v_l = \frac{4b}{a} \int_0^a \sqrt{a^p - x^p} dx \quad (11)$$

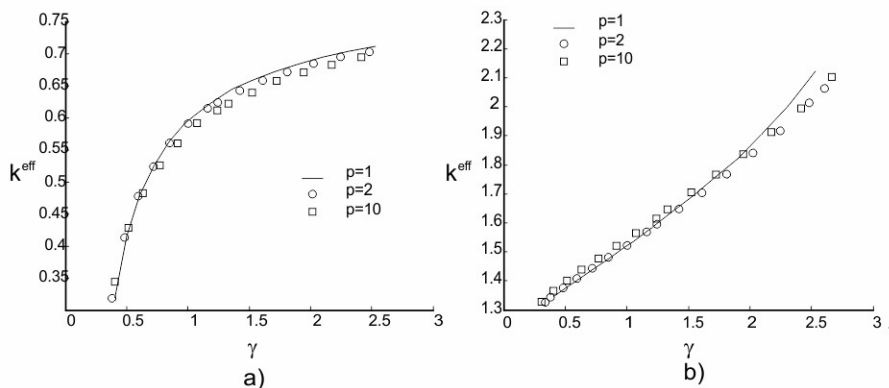
Kết quả tính gần đúng của v_l đối với các trường hợp p cụ thể:

$$v_l \Big|_{p=1} \approx 3.1416ab;$$

$$v_l \Big|_{p=2} \approx 3.7081ab;$$

$$v_l \Big|_{p=10} \approx 3.9866ab.$$

Các kết quả nhận được được trình bày trên Hình 6. Dễ dàng nhận thấy khi p trong phương trình (10) tăng, tức hình ellip biến đổi dần thành hình chữ nhật, thì ảnh hưởng của p tới sự dẫn nhiệt tổng thể của vật liệu là không đáng kể.



Hình 6. Hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu minh họa ở Hình 3 khi thay đổi độ dẹt γ với các trường hợp vật liệu a) lỗ rỗng; b) cốt liệu



5. Kết luận

Bài báo đã trình bày kết quả khảo sát ảnh hưởng của hình dạng cốt liệu tới hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu. Việc khảo sát trở nên đơn giản hơn so với các phương pháp khảo sát trước đây do sử dụng hàm level-set mô tả hình dạng của các loại cốt liệu kết hợp với việc sử dụng phương pháp XFEM/level-set để tính toán hệ số dẫn nhiệt hiệu quả của vật liệu. Kết quả khảo sát có thể được sử dụng để các kỹ sư, các nhà khoa học vật liệu tham khảo để chọn hình dạng, kích thước cốt liệu cho phù hợp với mục đích thiết kế vật liệu. Việc khảo sát ảnh hưởng của hình dạng, kích thước cốt liệu đối với các mô đun cơ học hiệu quả của vật liệu có thể được tiến hành tương tự và sẽ là hướng nghiên cứu tiếp của tác giả.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ phát triển khoa học và công nghệ quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 107.02-2014.08.

Tài liệu tham khảo

1. Pham D.C. (1994), "Bounds for the effective conductivity and elastic moduli of fully-disordered multi-component materials", *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 127, 191-198.
2. Phan-Thien N., Pham D.C. (2000), "Differential multiphase models for spheroidal inclusions: thermal conductivity and effective viscosity", *International Journal of Engineering Science*, 38, 73-88.
3. Milgrom M., Shtrikman S. (1989), "A layered-shell model of isotropic composites and exact expressions for the effective properties", *Journal of Applied Physics*, 66, 3429-3436.
4. Pham D.C., Torquato S. (2003), "Strong-contrast expansions and approximations for the effective conductivity of isotropic multiphase composites", *Journal of Applied Physics*, 94, 6591-6602.
5. Pham D.C. (2008), "Weighted effective medium approximations for conductivity of random composites", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51, 9, 3355-3361.
6. Pham D.C., Tran A.B., Do Q.H. (2013), "On the effective medium approximations for the properties of isotropic multicomponent matrix-based composites", *International Journal of Engineering Science*, 68, 75-85.
7. Tao R., Chen Z., Sheng P. (1990), "First-principles Fourier approach for the calculation of the effective dielectric constant of periodic composites", *Physical Review B*, 41, 2417-2420.
8. Michel J. C., Moulinec H., Suquet P. (1999), "Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172, 109-143.
9. Monchiet V, Bonnet G (2013), "A polarization-based fast numerical method for computing the effective conductivity of composites", *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 23, 7, 1256-1271.
10. Monchiet V, Bonnet G (2012), "A polarization-based FFT iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 89, 1419-1436.
11. Jianhua Zhou, Aibing Yu, Yuwen Zhang (2007), "A Boundary Element Method for Evaluation of the Effective Thermal Conductivity of Packed Beds", *Journal of Heat Transfer*, 129-371
12. Tai Te Wu (1966), "The effect of inclusion shape on the elastic moduli of a two-phase material", *International Journal of Solids and Structures*, 2, 1-8.
13. Kaddouri W., El Moumen A., Kanita T., Madania S., Imad A. (2016), "On the effect of inclusion shape on effective thermal conductivity of heterogeneous materials", *Mechanics of Materials*, 92, 28-41.
14. Tong J., Nan C.-W., Fu J., Wuhan, Guan X., Xi'an (2001), "Effect of inclusion shape on the effective elastic moduli for composites with imperfect interface", *Acta Mechanica*, 146, 127-134.
15. Yvonnet J., He Q.-C. (2008), "Numerical modelling of the effective conductivities of composites with arbitrarily shaped inclusions and highly conducting interface", *Composites Science and Technology*, 68, 13, 2818-2825.
16. Yvonnet J., Le Quang H., He Q.-C. (2008), "An XFEM level set approach to modelling surface/interface effects and computing the size-dependent effective properties of nanocomposites", *Computational Mechanics*, 42, 1, 119-131.
17. Sukumar N., Chopp DL., Moës N., Belytschko T (2001), "Modeling holes and inclusions by level-sets in the extended finite-element method", *International Journal of Solids and Structures*, 190, 6183-6200.
18. Yvonnet J., He Q.-C., Toulemonde C. (2008). "Numerical modelling of the effective conductivities of composites with arbitrarily shaped inclusions and highly conducting interface", *Composites Science and Technology*, 68, 2825-2828.
19. Soheil Mohammadi (2008), "Extended Finite Element Method Book", Published by Blackwell Publishing Ltd.
20. Tran A.B., Yvonnet J., He Q.-C., Toulemonde C., Sanahuja J. (2011), "A multiple level set approach to prevent numerical artefacts in complex microstructures with nearby inclusions within XFEM", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 85, 1436-1459.
21. Moës N, Cloirec M, Cartraud P, Remacle J-F (2003), "A computational approach to handle complex microstructure geometries", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192, 3163-3177.
22. Sonon B., Francois B., Massart T.J. (2012), "A unified level set based methodology for fast generation of complex microstructural multi-phase RVEs", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 223, 103-122.
23. Sonon B., Massart T.J. (2013), "A Level set-based Representative Volume Element generator and XFEM Simulations for textile and 3D-reinforced composites", *Materials*, 6, 5568-5592.
24. Sonon B., Francois B., Massart T.J. (2015), "An advanced approach for the generation of cellular materials Representative Volume Elements using distance fields and level sets", *Computational Mechanics*, 56, 2, 221-242.
25. Reid Kawamoto, Edward Andò, Gioacchino Viggiani, José E. Andrade (2016), "Level set discrete element method for three-dimensional computations with triaxial case study", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 91, 1-13.